

University of Texas Rio Grande Valley

ScholarWorks @ UTRGV

Civil Engineering Faculty Publications and
Presentations

College of Engineering and Computer Science

8-2013

Accuracy Analysis of Parallel Method based on Non-overlapping Domain Decomposition Method

Moonho Tak
Hanyang University

Yooseob Song
The University of Texas Rio Grande Valley

Hye-Kwan Jeon
Hanyang University

Taehyo Park

Follow this and additional works at: https://scholarworks.utrgv.edu/ce_fac



Part of the [Applied Mathematics Commons](#), [Civil Engineering Commons](#), and the [Other Physical Sciences and Mathematics Commons](#)

Recommended Citation

Tak, Moonho; Song, Yooseob; Jeon, Hye-Kwan; and Park, Taehyo, "Accuracy Analysis of Parallel Method based on Non-overlapping Domain Decomposition Method" (2013). *Civil Engineering Faculty Publications and Presentations*. 5.

https://scholarworks.utrgv.edu/ce_fac/5

This Article is brought to you for free and open access by the College of Engineering and Computer Science at ScholarWorks @ UTRGV. It has been accepted for inclusion in Civil Engineering Faculty Publications and Presentations by an authorized administrator of ScholarWorks @ UTRGV. For more information, please contact justin.white@utrgv.edu, william.flores01@utrgv.edu.



비중첩 영역 분할기법 기반 병렬해석의 정확도 분석

탁 문 호¹ · 송 유 섭¹ · 전 혜 관¹ · 박 대 효^{1*}

¹한양대학교 건설환경공학과

Accuracy Analysis of Parallel Method based on Non-overlapping Domain Decomposition Method

Moonho Tak¹, Yooseob Song¹, Hye-Kwan Jeon¹ and Taehyo Park^{1*}

¹Department of Civil and Environmental Engineering, Hanyang University, Seoul, 133-791, Korea

Abstract

In this paper, an accuracy analysis of parallel method based on non-overlapping domain decomposition method is carried out. In this approach, proposed by Tak *et al.*(2013), the decomposed subdomains do not overlap each other and the connection between adjacent subdomains is determined via simple connective finite element named interfacial element. This approach has two main advantages. The first is that a direct method such as gauss elimination is available even in a singular problem because the singular stiffness matrix from floating domain can be converted to invertible matrix by assembling the interfacial element. The second is that computational time and storage can be reduced in comparison with the traditional finite element tearing and interconnect(FETI) method. The accuracy of analysis using proposed method, on the other hand, is inclined to decrease at cross points on which more than three subdomains are interconnected. Thus, in this paper, an accuracy analysis for a novel non-overlapping domain decomposition method with a variety of subdomain numbers which are interconnected at cross point is carried out. The cause of accuracy degradation is also analyze and establishment of countermeasure is discussed.

Keywords : accuracy analysis, non-overlapping domain decomposition, parallel method, interfacial element

1. 서 론

1950년대에 유한요소법(finite element method, 이하 FEM)이 개발된 이래, FEM은 과거 수 십 년간 공학분야에서 가장 널리 이용되는 수치해석법 중 하나였으며, 같은 시기 동안 많은 학자들에 의해 FEM 지배방정식의 해법에 대한 몇몇 방법론들이 제안되어 왔다. 그 중 직접법(direct method)은 정적(static)해석 혹은 내연적(implicit) 시간 적분법을 이용한 동적(dynamic)해석에서 가장 많이 사용되는 방법이며, 특히 가우스 소거법(gauss elimination)은 현재 가장 효율적인 직접법이라 할 수 있다. 하지만 가우스 소거법은 적은 수의 자유도(degrees of freedom)를 갖는 해석에서는 빠르고 정확하게 해를 구할 수 있지만, 자유도의

수가 많은 대규모 유한요소모델의 해석의 경우에는 강성행렬(stiffness matrix)이 symmetric하고 positive definite하며, 띠행렬(banded matrix)임에도 불구하고 연산속도가 느려지고 과도한 저장공간이 요구된다는 제한점을 갖는다. Irons(1970)은 이러한 문제점을 극복하기 위해 연산속도가 매우 빠르면서도 메모리 공간을 적게 차지하는 가우스 소거법에 대한 frontal 해법을 제안하였고, 이 방법은 지금도 많은 상용 유한요소 프로그램에서 사용 중이다. 이 후, frontal method를 병렬 컴퓨팅 환경으로 확장시킨 multifrontal method가 제안되어 대규모 해석에서 보다 나은 효율성과 안정성을 얻게 되었다(Duff *et al.*, 1973). 직접법 외에 FEM의 지배방정식의 해를 구하는 또 다른 방법론으로 반복법(iterative method)을 들 수 있으며, 이 접근법은 초기에

* Corresponding author:

Tel: +82-2-2220-4562; E-mail: cepark@hanyang.ac.kr

Received July 15 2013; Revised August 1 2013;

Accepted August 2 2013

©2013 by Computational Structural Engineering Institute of Korea

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License(<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

근사해로부터 시작하여 반복계산을 통해 정해와의 오차를 줄여나가 원하는 허용오차 범위에 들어오게 되면 계산을 종료하는 방법이다.

한편, 영역 분할기법(domain decomposition method)에 기반한 병렬해석은 FEM에서 거대희소행렬(large sparse matrix)을 계산하는데 있어 매우 효율적인 방법이라 할 수 있다. 편미분방정식(partial differential equation)을 풀기 위해 Schwarz(1870)에 의해 처음 제안된 영역 분할기법의 기본 개념은 본래의 해석영역을 여러 개의 하위도메인(subdomain)들로 분할하고 각각의 하위도메인의 해석이 서로 독립적으로 이루어진다는 데 있다.

영역 분할기법은 크게 중첩법(overlapping method)과 비중첩법(non-overlapping method)으로 나뉘는데, 본 연구에서는 특히 비중첩 영역 분할기법에 의한 초점을 맞추어 해석을 수행하였다. 이 방법에서는 하위도메인끼리의 연속성을 하위도메인들 사이의 인터페이스를 따라 라그랑지 승수(lagrange multiplier) 같은 상호 연결 변수를 발생시켜 적합조건(compatibility condition)을 만족시키는 방법을 이용하며, 그 중 Farhat 등(1991)이 제안한 FETI(finite element tearing and interconnect)법이 가장 널리 사용된다. FETI법은 반복법에 기반하며, 대부분의 계산과정이 각기 다른 하위도메인들 상에서 서로 다른 CPU를 이용하여 독립적으로 이루어지기 때문에 높은 확장성(scalability)을 보인다는 장점이 있지만 하위도메인의 강성 행렬이 특이행렬(singular matrix)로 되어버리는 상황이 발생한다. 즉, 하위도메인이 Dirichlet 경계조건을 갖지 않는 floating 도메인일 경우에는 해석에 수치적 어려움이 따른다. FETI법에서 이 문제를 극복하기 위해서는 가상역행렬(pseudo-inverse matrix)과 기하학적 접근 혹은 요소분해(factorization)를 통해 계산되는 하위도메인의 강체모드(rigid body mode)를 의미하는 강성행렬의 null space의 기저(basis)에 대한 계산이 필요하다(Lee *et al.*, 2010).

Tak 등(2013)은 이러한 단점을 극복하고자 직접법을 이용한 새로운 비중첩 영역 분할기법을 제안하였다. 직접법은 일반적으로 간단한 모델에 대한 해석에 있어서는 반복법보다 우월하므로 대규모 시스템에 대한 해석에 있어서는 전체 영역을 작은 하위도메인들로 나누고 모든 하위도메인들에 Dirichlet 경계조건을 부여하여 해석을 수행한다면 영역 분할기법을 이용한 직접법이 반복법에 비해 더 효율적일 수 있다. 게다가, 제안된 방법은 앞서 FETI법에서 필요했던 가상역행렬(pseudo-inverse matrix)과 강성행렬의 null space의 기저(basis) 계산이 필수적이지 않으므로 병렬해석에 있어서 높은 확장성을 기대할 수 있다. Tak 등(2013)이 제안한 새

로운 비중첩 영역 분할기법의 높은 확장성과 효율성은 기존 FETI법과의 비교를 통해 검증되었지만, 본 해석기법 적용 시 3개 이상의 하위도메인들이 한 점에서 연결되는 경우인 cross point에서 해석의 정확도가 저하된다는 문제점이 발생하였다.

따라서 본 논문에서는 Tak 등(2013)의 연구에서 제안된 새로운 비중첩 영역 분할기법에 대해 다양한 영역 분할방법에 따라 발생할 수 있는 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수에 따른 정확도 분석(accuracy analysis)이 수행되고 정확도가 떨어지는 부분에 대한 원인분석 및 대책이 논의된다.

2. 비중첩 영역 분할기법

이 장에서는 Tak 등(2013)에서 제안된 비중첩 영역 분할기법(non-overlapping domain decomposition method)을 소개한 후, 이론에 대한 수식 전개 및 병렬알고리즘의 흐름을 상세하게 나타내고자 한다.

2.1 비중첩 영역 분할기법 이론

직접법을 이용한 비중첩 영역 분할기법을 수행함에 있어 계면노드(interface node)들에 작용하는 힘과 floating 도메인상의 비가역(non-invertible) 강성행렬에서 prescribed 도메인상의 가역(invertible) 강성행렬로의 변환 등, 2가지 주요 요소들이 계산되어야 한다. 이 과정을 위해서는 경계면력(interface force)이 계산되어야 하고 경계조건 규정에 의한 적합조건(compatibility condition)을 만족시키는 계면유한요소(interfacial finite element)가 도입된다.

일반적으로 FEM에서 정적고체해석에 사용되는 연립방정식(system of equation)은 다음과 같다.

$$Ku = f \text{ on } \Omega \quad (1)$$

여기서, K 는 symmetric, positive definite하고 banded matrix인 특징을 가지고 있는 강성행렬을 나타내며, u 와 f 는 각각 변위벡터와 하중벡터를 나타낸다. 전체 계산영역 Ω 는 N 개의 하위도메인 $\Omega_i (i=1, \dots, N)$ 으로 분할되며, 각각의 하위도메인에서 식 (1)은 위치자 t 로 표기되는 내부영역(internal zone)과 f 로 표기되는 계면영역(interfacial zone)에 관한 식으로 나뉘어 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\begin{bmatrix} K_i^{tt} & K_i^{tf} \\ K_i^{ft} & K_i^{ff} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^t \\ u_i^f \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^f \end{Bmatrix} \text{ on } \Omega_i, \quad i=1, \dots, N \quad (2)$$

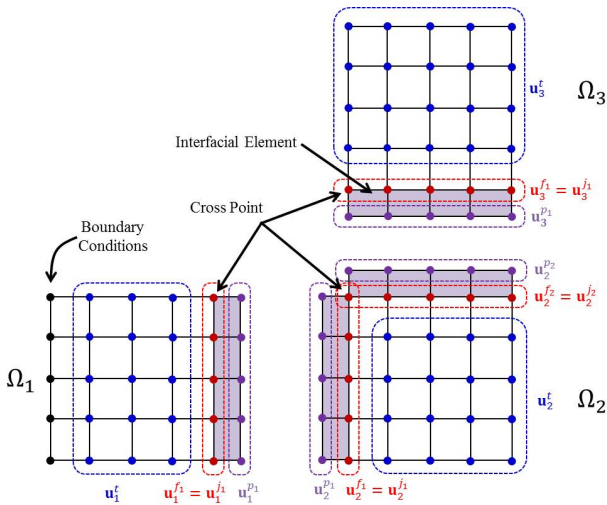


Fig. 1 Displacements of internal, interfacial and outer nodes on the decomposed subdomain

여기서, K_i^{tt} , K_i^{tf} , K_i^{ft} 그리고 K_i^{ff} 는 각각 $n^t \times n^t$, $n^t \times n^f$, $n^f \times n^t$, $n^f \times n^f$ 의 크기를 가진 행렬이며, n^t 와 n^f 는 각각 하위도메인 별 내부노드(internal node)와 계면노드(interfacial node)의 총 자유도(degree of freedom) 개수이다.

또한, 계면노드 f 에는 Fig. 1과 같이 2개 혹은 그 이상의 하위도메인들이 공유되므로 계면노드는 공유되는 하위도메인의 개수 s 에 따라 서로 독립적인 계면노드들(f_1, f_2, \dots, f_s)로 분할될 수 있고, 이에 따라 식 (2)는 다음과 같이 표현 가능하다.

$$\begin{bmatrix} K_i^{tt} & K_i^{tf_1} & \dots & K_i^{tf_s} \\ K_i^{f_1t} & K_i^{f_1f_1} & \dots & K_i^{f_1f_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_i^{f_st} & K_i^{f_sf_1} & \dots & K_i^{f_sf_s} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^t \\ u_i^{f_1} \\ \vdots \\ u_i^{f_s} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^{f_1} \\ \vdots \\ f_i^{f_s} \end{Bmatrix} \quad \text{on } \Omega_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (3)$$

한편, Fig. 1에서 음영처리 되어 있는 계면요소(interfacial element)에 대한 연립방정식은 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$\begin{bmatrix} D_i^{jj} & D_i^{jp} \\ D_i^{pj} & D_i^{pp} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^j \\ u_i^p \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_i^j \\ f_i^p \end{Bmatrix} \quad \text{on } \Omega_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

여기서, 위첨자 p 와 j 는 각각 계면요소의 외측(outer)노드들과 계면요소내의 노드들 중 하위도메인 쪽에 인접한(adjacent) 노드들의 위치를 의미하며 식 (3)에서 표현된 바와 마찬가지로 p_1, p_2, \dots, p_s 와 j_1, j_2, \dots, j_s 로 분할이 가능하다. 또한, D 는 부호화된 안정성대각행렬(stability diagonal matrix)이며, singular positive definite한 특성을 지니고 있다. D 행렬은

특히 floating 도메인에서 적용된 Dirichlet 경계조건을 이용하여 가역(invertible) 강성행렬을 구성하는데 중요한 역할을 하며 행렬의 구성 블록(block) 간에는 다음과 같은 관계를 갖도록 정의해 준다.

$$D_i^{jj} = D_i^{pp}, \quad D_i^{jj} = -D_i^{jp} = -D_i^{pj} \quad (5)$$

식 (5)와 계면요소 외측노드들의 경계조건 등을 적용하면 식 (4)는 $D_i^{pj} [D_i^{jj}]^{-1} f_i^j = -f_i^p$ 로 정리된다. 또한 하위도메인과 계면요소가 결합될 때 외측노드에 작용하는 반력이 계산되며 이 힘은 결국 인접 하위도메인에 하중으로 작용하게 된다.

한편, 하위도메인 Ω_i 의 유한요소들이 계면요소들과 결합될 때 식 (3)의 계면노드들은 식 (4)의 인접노드들과 동일해진다. 즉 $f = j$ 의 관계가 성립하며, 이를 바탕으로 전체 시스템에 대한 연립방정식이 다음과 같이 구성된다.

$$\begin{bmatrix} \text{group1} & & \\ \begin{bmatrix} K_i^{tt} & K_i^{tf_1} & \dots & K_i^{tf_s} \\ K_i^{f_1t} & K_i^{f_1f_1} + D_i^{f_1p_1} & \dots & K_i^{f_1f_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_i^{f_st} & K_i^{f_sf_1} & \dots & K_i^{f_sf_s} + D_i^{f_sp_s} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ D_i^{f_1p_1} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D_i^{f_sp_s} & \dots & 0 \end{bmatrix} \\ & \text{group2} & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_i^t \\ u_i^{f_1} \\ \vdots \\ u_i^{f_s} \\ u_i^{p_1} \\ \vdots \\ u_i^{p_s} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^{f_1} \\ \vdots \\ f_i^{f_s} \\ f_i^{p_1} \\ \vdots \\ f_i^{p_s} \end{Bmatrix} \quad (6)$$

계면요소의 모든 외측노드들에 Dirichlet 경계조건이 적용된다는 가정 하에, 식 (6)의 'group1' 블록행렬은 symmetric, 띠행렬(banded matrix)이라는 특성을 지닌 가역(invertible) 강성행렬이 되지만 기존 positive definite이었던 'group1' 블록행렬은 안정성대각행렬 D 의 영향으로 인해 대각요소의 값들이 작아져 positive definite의 성질을 잃을 수 있다. 만약 대각행렬 D 의 요소 값이 크다면 'group1' 블록행렬의 대각요소들이 0 혹은 음의 값을 가질 수 있으며, 이 문제는 특히 3개 이상의 하위도메인이 접촉하는 cross point에서 명백하게 발생하기 쉽다. 이 문제를 극복하기 위해서는 D 행렬의 요소 값을 충분히 작으면서도 어느 정도의 값을 갖도록 적절하게 정의해야 하며, 계면노드에는 충분한 경계조건이 주어져야 한다.

앞서 언급한 조건하에서, 계면에서의 변위 $u_i^f(u_i^{f_1}, \dots, u_i^{f_s})$ 는 다음의 식을 이용하여 계산된다.

$$\begin{Bmatrix} u_i^t \\ u_i^f \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} A_i^{tt} & A_i^{tf} \\ A_i^{ft} & A_i^{ff} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^f \end{Bmatrix} = A_i f_i \quad (7)$$

여기서, A 는 'group1' 강성행렬의 역행렬을 나타낸다. 이 역행렬을 계산하는데 소요되는 시간은 전체 해석시간에 큰 영향을 주며, 계면노드 f 의 개수에 달려 있으므로 계면노드의 수를 적게 할수록 병렬 효율성이 좋아진다. 또한, 'group1' 블록행렬이 띠행렬(banded matrix)이고 positive definite이라면 식 (7)에서 역행렬을 계산할 때 Schur Complement를 이용하는 것이 가장 좋으며, 식 (7)은 식 (2), 식 (4)와 Schur Complement를 이용하여 다음과 같이 재정의 될 수 있다.

$$\begin{Bmatrix} u_i^t \\ u_i^f \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} S_i^{-1} \\ -[K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} K_i^{ft} S_i^{-1} \\ -S_i^{-1} K_i^{tf} [K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} \\ [K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} + [K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} K_i^{ft} S_i^{-1} K_i^{tf} [K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^f \end{Bmatrix} \quad (8)$$

여기서, S_i 는 $K_i^{tt} - K_i^{tf} [K_i^{ff} + D_i^{jj}]^{-1} K_i^{ft}$ 로 계산되어 지는 Schur Complement를 나타낸다.

한편, 식 (6)에서 계면요소 외측노드들에 작용하는 반력 ($f_i^{p_1}, f_i^{p_2}, \dots, f_i^{p_s}$)들은 식 (6)의 'group2'와 식 (7)을 이용하여 다음과 같이 계산된다.

$$\begin{Bmatrix} f_i^{p_1} \\ \vdots \\ f_i^{p_s} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} D_i^{p_1 j_1} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & D_i^{p_s j_s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i^{f_1 t} & A_i^{f_1 f_1} & \dots & A_i^{f_1 f_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_i^{f_s t} & A_i^{f_s f_1} & \dots & A_i^{f_s f_s} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_i^t \\ f_i^{f_1} \\ \vdots \\ f_i^{f_s} \end{Bmatrix} \quad (9)$$

여기서, 임의의 하위도메인(Ω_i)이 또 다른 하위도메인(Ω_{i+1})과 인접해 있을 때, Ω_i 의 계면요소 외측노드들에 작용하는 반력벡터는 Ω_i 의 계면요소 외측노드들과 맞닿는 Ω_{i+1} 의 계면요소 외측노드들에 작용하는 반력벡터와 크기는 같고 방향은 반대이다. 즉, 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$f_i^p = -f_{i+1}^p \text{ on } \Gamma^p \quad (10)$$

여기서, Γ^p 는 계면영역(interface zone)이다.

또한, 식 (10)을 이용하여 각 하위도메인에서의 경계면력(interface force)이 계산되며, 모든 하위도메인이 전체도메인으로 조립(assemble)될 때, 전체도메인에서의 힘의 평형은 다음과 같이 정의된다.

$$\begin{bmatrix} A_i^{f_1 f_1} + A_{i+1}^{f_1 f_1} & A_{i+1}^{f_1 f_2} & 0 & 0 & \dots \\ A_{i+1}^{f_2 f_1} & A_{i+1}^{f_2 f_2} + A_{i+2}^{f_2 f_2} & A_{i+2}^{f_2 f_3} & 0 & \dots \\ 0 & A_{i+2}^{f_3 f_1} & A_{i+2}^{f_3 f_2} + A_{i+3}^{f_3 f_3} & A_{i+3}^{f_3 f_4} & \dots \\ 0 & 0 & A_{i+3}^{f_4 f_1} & A_{i+3}^{f_4 f_2} + A_{i+4}^{f_4 f_3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f_i^{f_1} \\ f_{i+1}^{f_2} \\ f_{i+1}^{f_3} \\ f_{i+1}^{f_4} \\ \vdots \\ f_{i+1}^{f_N} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} A_i^{f_1 t} f_i^t + A_{i+1}^{f_1 t} f_{i+1}^t \\ A_{i+1}^{f_2 t} f_{i+1}^t + A_{i+2}^{f_2 t} f_{i+2}^t \\ A_{i+2}^{f_3 t} f_{i+2}^t + A_{i+3}^{f_3 t} f_{i+3}^t \\ A_{i+3}^{f_4 t} f_{i+3}^t + A_{i+4}^{f_4 t} f_{i+4}^t \\ \vdots \\ A_{i+1}^{f_N t} f_{i+1}^t + A_{i+2}^{f_N t} f_{i+2}^t \end{Bmatrix} \quad (11)$$

FETI법에서의 라그랑지 승수(lagrange multiplier)와 같은 역할을 하는 계산된 경계면력(interface force)은 각각 적절한 하위도메인에 적용되고, 마지막으로 식 (7)을 이용하여 각 하위도메인에서의 변위가 계산된다. 한편, 식 (11)은 연결행렬(connectivity matrix) B 를 이용하여 다음과 같이 일반화된 형태로 표현 가능하다.

$$\left(\sum_{i=1}^N B_i A_i B_i^T \right) f^f = - \left(\sum_{i=1}^N B_i A_i f_i^t \right) \quad (12)$$

B 는 부호화된 Boolean entry인 -1, 0, 1로 이루어진 논리행렬이며 크기는 $(n^t + n^f) \times n^c$ 이다. 여기서, n^c 는 연결된 자유도의 개수이다.

2.2 제안된 기법에 대한 병렬해석 알고리즘

제안된 영역 분할기법에 대한 병렬 알고리즘이 높은 효율성을 얻기 위해서는 해석이 실행되는 하드웨어 시스템에 최적화되어야 한다. 본 연구의 병렬 알고리즘은 Single Instruction Multiple Data(SIMD)에 기반하고 각각의 하위도메인은 Message Passing Interface(MPI) 라이브러리를 통해서로 통신한다. 또한, 행렬-벡터 곱셈연산과 루프(loop)명령을 효율적으로 수행하기 위해 공유메모리(shared memory) 멀티프로세서 시스템 환경에서의 인터페이스 라이브러리인 Open Multiprocessing(OpenMP)가 이용된다.

제안된 영역 분할기법에서 가장 중요한 점들 중 하나는 힘의 평형방정식인 식 (10)이 계산되는 CPU와 메모리로 전송되는 경계면력(interface force)과 작용하중(prescribed force)에 대한 정보가 매우 부족하다는 것이다. 그리고 Schur Complement를 계산하기 위한 행렬-벡터 곱셈연산과 그것의 역행렬

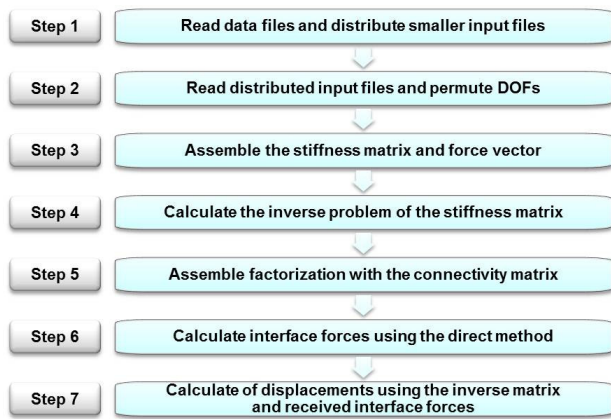


Fig. 2 Parallel algorithm of the proposed non-overlapping domain decomposition method

을 계산하는 과정이 전체 해석에 대한 running time과 메모리 소모에 큰 영향을 미치므로 최적화된 병렬 알고리즘이 필요하다. Fig. 2는 FEM으로 제안된 영역 분할기법에 대해 좋은 수치효율성과 병렬확장성을 가진 알고리즘을 구현하기 위해 필요한 과정을 도식적으로 나타낸 것이다.

1단계는 전체 input 파일을 읽어 들이고 병렬해석을 위하여 분할된 하위도메인 별 새로운 input 파일들을 생성하기 위한 단계이다. 이 단계에서는 유한요소해석을 위한 노드, 요소, 재료 그리고 영역 분할에 관한 정보를 포함하는 input 파일을 멀티프로세스 시스템에서 root 프로세서인 CPU-1에서 읽어 들이고 병렬 컴퓨팅을 위한 하위도메인 별 input 파일을 생성시키기 위해 하위도메인 간의 연결 관계를 결정한다. 연결 관계는 하위도메인 간 계면노드들을 찾고 그들의 자유도를 결정하는 것으로 구성되는데 이 과정에서 각 하위도메인에 포함되는 모든 노드들과 인접 하위도메인 상의 노드들의 연결 관계가 파악되어야 함과 동시에 해당 노드가 cross point인지 아닌지에 대한 여부가 확인되어야 하므로 많은 전산시간이 소요된다. 그 후 이 관계들에 대한 정보가 CPU-1로부터 다른 CPU들로 전송되고 이로부터 기존 input 파일은 병렬 컴퓨팅을 위한 분할된 input 파일들로 재편성된다.

2단계는 분할된 input 파일을 읽고 유한요소해석을 위한 자유도 번호가 재할당 및 재배열되는 과정이다. 1단계에서 분할된 input 파일들이 CPU-1~CPU-N에서 읽혀지고 노드, 요소, 재료, 경계조건 그리고 작용하중들에 대한 정보는 메모리에 저장된다. 이 정보들을 이용해 구성된 하위도메인 별 강성행렬이 symmetric, positive definite, banded한 특성을 모두 만족한다면, 각각의 CPU들에서 개별적인 유한요소해석이 수행된다. 또한, 이 과정에서는 Cuthill-McKee 알고리즘(Cuthill *et al.*, 1969)을 적용하여 기존 sparse한

강성행렬을 띠행렬(banded matrix)로 만들기 위한 노드 재배열이 수행된다. 이로 인해 식 (2)의 대각 블록행렬 K^{tt} 와 K^{ff} 의 bandwidth가 감소되어 Schur Complement S 를 계산하는데 효율성을 높일 수 있고 이후 식 (8)에서 역행렬을 계산하는 과정에서도 수치적으로 효율성이 개선된다.

3단계는 각각의 하위도메인 별로 식 (2)의 강성행렬과 하중 벡터가 조립(assembly)되는 단계이다. 이 단계에서는 계면영역에 대한 블록 강성행렬 K^{ff} 에 부호화된 안정성대각행렬(stability diagonal matrix) D^{jj} 를 합한 $K^{ff}+D^{jj}$ 가 positive definite인지 아닌지를 판단한다. 이론적으로 positive definite이고 symmetric-banded한 행렬의 계산에 사용되는 Cholesky 분해법이 positive definite이 아닌 symmetric-banded 행렬의 계산에 사용되는 LU 분해법에 비해 연산속도가 2배 더 빠르기 때문에 $K^{ff}+D^{jj}$ 의 positive definite 여부는 수치효율성과 직접적으로 연관되어 있다. 일반적으로 D^{jj} 의 대각요소들이 음의 값을 가질 때 $K^{ff}+D^{jj}$ 는 positive definite이 아니며, 이러한 현상은 주로 cross point에서 발생한다. 또한, 수치효율성에 더불어 수치안정성도 $K^{ff}+D^{jj}$ 행렬에 영향을 받는다. D^{jj} 요소들의 수치가 너무 작으면 $K^{ff}+D^{jj}$ 는 특이행렬(singular matrix)이 되고 반대로 너무 큰 경우에는 수치적 불안정(instability)이 발생할 수 있으므로 가장 좋은 방법은 D^{jj} 의 요소 값을 K^{ff} 의 요소들이 가지는 수치들 중 가장 큰 값보다는 작으면서 어느 정도 충분한 값을 갖게 하는 것이다.

4단계는 강성행렬의 역행렬이 계산되는 단계이다. 이 단계에서는 식 (8)에 적용되는 Schur Complement와 요소분해(factorization)가 계산된다. Schur Complement를 이용한 역행렬 계산 속도는 앞서 말한 대로 $[K^{ff}+D^{jj}]$ 행렬의 positive definite 여부에 달려 있다. 만약 positive definite라면, Schur Complement가 positive semidefinite인 경우에 한하여 식 (6)의 'group1'은 positive semidefinite가 된다. 이 것은 식 (8)에서 모든 요소들에 대한 역행렬과 선형방정식 계산 과정에 Cholesky 분해법을 사용할 수 있다는 것을 의미하며, 이 경우 $[K^{ff}+D^{jj}]$ 는 상삼각 행렬(upper triangular matrix)인 Cholesky factor Y 를 이용하여 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$[K^{ff}+D^{jj}] = Y^T Y \quad (13)$$

반면에, Schur Complement가 positive definite이 아닌 경우에는 역행렬과 선형방정식 계산 과정에 Cholesky 분해법 대신 LU 분해법이 사용되며 $[K^{ff}+D^{jj}]$ 는 다음과 같

이 정의된다.

$$[K^{ff} + D^{jj}] = LU \quad (14)$$

여기서, L 과 U 는 각각 하삼각 행렬(lower triangular matrix)과 상삼각 행렬(upper triangular matrix)을 나타낸다. 한편, $[K^{ff} + D^{jj}]$ 와 Schur Complement를 구한 후 식 (7) 상의 역행렬 A_i 를 얻기 위해서는 $[K^{ff} + D^{jj}]^{-1}$, $[K^{ff} + D^{jj}]^{-1}K^{ft}$ 그리고 S^{-1} 을 이용하여 행렬-벡터 곱셈 연산이 수행되어야 하며, 이 과정에서 많은 전산시간이 소요된다. 따라서 멀티스레딩(multithreading)이 필수적이며, 본 연구에서는 공유메모리(shared memory) 멀티프로세서 시스템 환경에서 현재 가장 널리 사용되는 인터페이스 라이브러리인 Open Multiprocessing(OpenMP)가 사용되었다.

5단계는 각 하위도메인별로 계산된 역행렬이 연결행렬(connectivity matrix)을 이용하여 조립(assembly)된다. 이를 위해 가장 먼저 인접 하위도메인들 사이의 관계를 고려하여 연결행렬 B 가 계산되고 이를 이용하여 각각의 하위도메인별 $B_i A_i B_i^T$ 와 $B_i A_i f_i^T$ 가 계산된다. 그리고 나서 이 값들을 식 (12)에서 나타내어진 바와 같이 전체 영역에 관한 식으로 조립(assembly)하기 위하여 root 프로세서인 CPU-1로 전송된다. 이 과정에선 앞서 밝힌 바와 같이 계면요소의 자유도 수가 적을수록 전송되어야 할 데이터의 양이 적어지기 때문에, 높은 효율성을 얻기 위해서는 n^t (내부노드들의 자유도 개수) \gg n^f (계면노드들의 자유도 개수)가 만족되어야 한다.

6단계는 직접법(direct method)를 이용하여 경계면력(interface force)들이 계산된다. 이 단계에서는 식 (12)의 $\sum_{i=1}^N B_i A_i B_i^T$ 가 띠행렬(banded matrix)이지만 positive definite는 아니기 때문에 경계면력 f^f 를 구하기 위하여 LU 분해법이 이용된다.

마지막으로 7단계는 앞서 계산된 블록 역행렬과 경계면력을 이용하여 변위벡터가 계산된다. 이를 위해 6단계에서 계산된 경계면력이 root 프로세서로부터 각 하위도메인들로 전송되고, 이 힘들과 앞서 4단계에서 계산되었던 블록 역행렬을 이용하여 식 (7)이 풀리게 된다. 이 단계에선 OpenMP를 이용한 행렬-벡터 연산만 필요하기 때문에 빠르게 결과를 도출할 수 있다.

3. 수치예제를 통한 정확도 분석

Tak 등(2013)은 기존의 FETI법과의 비교를 통해 제안된 비중첩 영역 분할기법의 수치효율성(accuracy)과 확장

성(scalability)을 검증하였다. 하지만 해석의 정확도 측면에서는 cross point에 접촉하는 하위도메인 수가 증가할수록 정확도가 저하된다는 문제점이 발생하였다. 따라서 본 논문에서는 제안된 비중첩 영역 분할기법에 대해 영역 분할방법에 따라 발생할 수 있는 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수에 따른 정확도 분석(accuracy analysis)이 수행되고 정확도가 떨어지는 부분에 대한 원인분석 및 대책이 논의된다.

제안된 기법에 대한 해석은 클러스터(cluster)라 불리는 대규모 병렬처리 컴퓨터(massively parallel processing computer, MPP) 시스템 환경에서 수행된다. 본 연구기관에서 자체 구축된 클러스터 시스템은 1개의 master 노드와 64개의 slave 노드를 합하여 총 65개의 노드로 구성되어 있고, 이 중 master 노드는 2개의 64비트 quad-core Intel Xeon Nehalem E5530 프로세서(8core, 48GB 메모리)로 구성된다. 또한, 각각의 slave 노드는 master 노드와 마찬가지로 2개의 quad-core 프로세서(8core, 24GB 메모리)로 구성되므로 slave 노드는 도합 512core, 1,536GB 메모리로 이루어져 있다. quad-core 프로세서는 각각의 core가 2.4GHz의 클럭속도(clock speed)와 8M L3 캐시 메모리를 탑재하고 있으며, 5.86GT/s의 연결속도를 갖는 QuickPath Interconnect(QPI)로 다른 quad-core 프로세서와 연결되고, 25.6GB/s의 대역폭(bandwidth)을 갖는 채널(channel)을 통해 외부 기억 장치(external memory)에 연결된다.

Fig. 3은 제안된 기법의 정확도 분석을 위해 수행된 수치예제 모델의 형상을 나타낸 것이다. 모델은 2차원 원형 형상이며, 중심의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수에 따라 정확도를 분석하였다. 좀 더 정확한 분석을 위해 요소의 개수를 각각 608개와 2,432개로 달리하여 2가지 경우에 대한 해석을 수행하였으며, 탄성계수 E 와 포아송비 ν 는 각각 1.0e6PA와 0.3을 적용하였다. 그리고 경계조건으로는

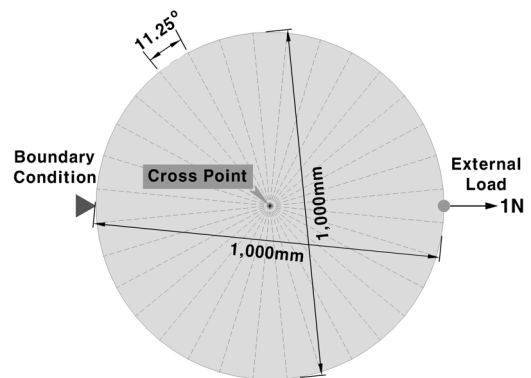


Fig. 3 Two-dimensional finite element model for accuracy analysis

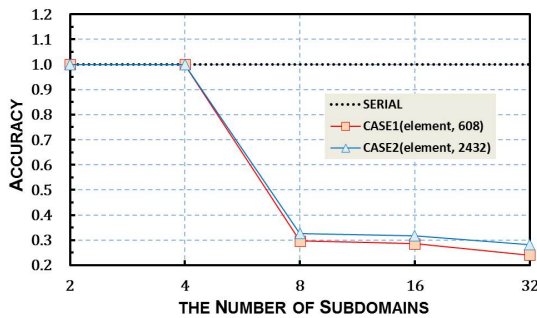


Fig. 4 Numerical results for an accuracy analysis in each case

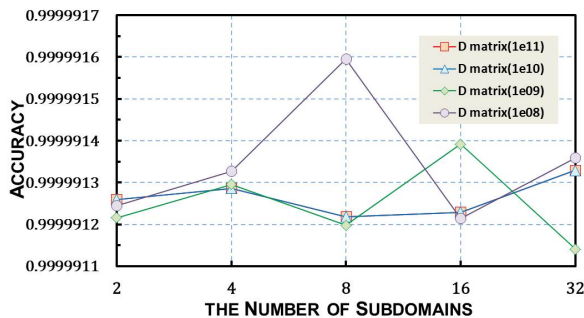


Fig. 5 Numerical results for an accuracy analysis according to the various values of D matrix

좌측의 1개 노드를 고정하였으며 외력은 우측 노드에 x 방향으로 1N을 가하였다.

Fig. 4는 1개의 cross point에 접촉하는 하위도메인 개수별 수치해석의 결과를 나타낸 그래프이다. y축은 영역 분할을 하지 않은 serial code에 의한 변위결과를 기준으로 하여 하위도메인을 2, 4, 8, 16 그리고 32개로 영역 분할한 경우에 대한 결과를 normalization한 것이다. 그림에서 나타나듯이 CASE1, CASE2 모두 하위도메인이 2개, 4개가 cross point에서 만나는 경우에 해석의 정확도는 거의 serial code에 가까웠다. 하지만 하위도메인의 수가 4개로부터 8개가 되면서 정확도는 35%이하로 급격하게 저하되었으며, 하위도메인의 수가 16개, 32개로 늘어나면서 정확도가 더욱 악화되는 현상이 발생하였다. 이러한 정확도 저하는 앞서 언급한 바와 같이 식 (6)의 'group1' 블록 행렬이 기존에는 symmetric, 띠행렬(banded matrix)이라는 특성을 지닌 가역(invertible) 강성행렬이지만 안정성대각행렬 D 가 추가되면서 D matrix의 대각요소 값들에 따라 positive definite의 성질을 잃을 수 있으며, 특히 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수가 늘어나면 'group 1' 블록 행렬에 미치는 D matrix의 영향이 커지기 때문에 그 값에 따라 정확도가 크게 좌우되는 것으로 판단된다. 이 문제를 극복하기 위해서는 D matrix의 요소 값을 충분히 작으면서도 어느 정도의 값을 갖도록 적절하게 정의해야 하며,

계면노드에는 충분한 경계조건이 주어져야 한다.

따라서 본 연구에서는 식 (4)에서의 D matrix의 요소 값에 따른 작용하중 지점에서의 변위 정확도를 분석하였으며, 그 결과를 Fig. 5에 나타내었다. 그림에서 나타나듯이 D matrix의 요소 값이 큰 값을 갖는 경우 cross point 접촉 분할영역 증가에 따른 변위의 정확도가 증가함을 알 수 있는 반면, D matrix의 요소 값이 작을 경우 cross point 접촉 분할 영역에 따른 정확도는 예측하기가 힘들 정도로 편차가 큼을 알 수 있다. 원인은 식 (6)에서 'group 1'의 강성행렬이 변화됨에 따라 정확도가 차이가 나는데 D matrix의 요소 값이 충분하지 않으면 식 (7)에서 A matrix의 계산 시 수치적 부정확성이 나타나기 때문이다. 따라서 이에 따른 민감도 해석이 차후 연구에서 필수적으로 수행되어야 할 것으로 판단된다.

4. 결 론

본 논문에서는 Tak 등(2013)의 연구에서 제안된 새로운 비중첩 영역 분할기법에 대해 다양한 영역 분할방법에 따라 발생할 수 있는 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수에 따른 정확도 분석(accuracy analysis)이 수행되고 정확도가 떨어지는 부분에 대한 원인분석 및 대책이 논의되었다. 이를 위해 새로운 비중첩 영역 분할기법에 대한 이론적 배경이 설명되었으며, 이를 바탕으로 구현된 FEM의 좋은 수치효율성과 병렬확장성을 가진 알고리즘을 구현하기 위해 필요한 과정이 설명되었다. 제안된 기법의 정확도 분석을 위해 2차원 원형 형상의 수치모델을 이용하여 요소의 개수에 따라 2가지 경우에 대한 수치해석이 수행되었다. 2가지 경우 모두 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수(2, 4, 8, 16, 32개)에 따른 해석의 정확도 비교를 통해 하위도메인이 2개, 4개가 cross point에서 만나는 경우는 결과가 거의 serial code에 가까웠지만 하위도메인의 수가 4개로부터 8개가 되면서 정확도는 35%이하로 급격하게 저하되었으며, 하위 도메인의 수가 16개, 32개로 늘어나면서 정확도가 더욱 악화되는 현상이 발생함을 알 수 있었다. 이는 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수가 늘어나면 식 (6)의 'group 1' 블록 행렬에 미치는 D matrix의 영향이 커지기 때문에 그 값에 따라 정확도가 크게 좌우되는 것으로 판단되어 본 연구에서는 또한 D matrix의 요소 값에 따른 수치해석의 정확도 분석이 수행되었다. 해석결과, D matrix의 요소 값이 큰 값을 갖는 경우 cross point 접촉 분할영역 증가에 따른 변위의 정확도가 증가함을 알 수 있는 반면, D matrix의 요소 값이 작은 경우 cross point 접촉 분할 영역

에 따른 정확도는 예측하기가 힘들 정도로 편차가 큼을 알 수 있었다. 원인은 식 (6)에서 'group 1'의 강성행렬이 변화됨에 따라 정확도가 차이가 나는데 D matrix의 요소 값이 충분하지 않으면 식 (7)에서 A matrix의 계산 시 수치적 부정확성이 나타나기 때문인 것으로 판단되며 따라서 이에 따른 민감도 해석이 차후 연구에서 필수적으로 수행되어야 할 것이다.

감사의 글

본 연구는 한국연구재단을 통해 교육과학기술부가 지원하는 “세계수준의 연구중심대학 육성사업(WCU)(R32-2008-20042-0)”의 지원을 받아 수행되었으며, 이에 감사드리는 바입니다.

참 고 문 헌

- Cuthill, E., Mckee, J. (1969) Reducing the Bandwidth of Sparse Symmetric Matrices, ACM '69 Proceedings of the 1969 24th National Conference, pp.157~172.
- Duff, I.S., Reid, J.K. (1973) The Multifrontal Solution of Indefinite Sparse Symmetric Linear Equations, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 9(3), pp.302~325.
- Farhat, C., Roux, F.X. (1991) A Method of Finite Element Tearing and Interconnecting and Its Parallel Solution Algorithms, *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 32(6), pp.1205~1227.
- Irons, B.M. (1970) A Frontal Solution Scheme for Finite Element Analysis, *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 2(1), pp.5~32.
- Lee, K.J., Tak, M., Park, T. (2010) The Mixed Finite Element Analysis for Saturated Porous Media Using FETI Method, *Journal of the Computational Structural Engineering*, 23(6), pp.693~702.
- Schwartz, H.A. (1870) Über einen Grenzübergang durch alternierendes Verfahren, *Vierteljahrsschrift der Naturforschenden Gesellschaft in Zürich*, 15, pp.272~286.
- Tak, M., Park, T. (2013) High Scalable Non-overlapping Domain Decomposition Method Using a Direct Method for Finite Element Analysis, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 264, pp.108~128.

요 지

본 논문에서는 새로운 비중첩 영역 분할 기법을 바탕으로 한 병렬해석의 정확도 분석이 수행된다. Tak 등(2013)에 의해 제안된 이 방법에서 분할된 하위도메인들은 서로 중첩되지 않으며 계면요소(interfacial element)라 불리는 가상연결유한요소를 통해 서로 간의 관계가 결정된다. 이 접근법의 주요 장점은 영역 분할시 floating 도메인에서 발생할 수 있는 특이강성행렬(singular stiffness matrix)을 계면요소의 결합을 이용하여 가역행렬(invertible matrix)로 변환할 수 있다는 것과 기존의 FETI법에 비하여 해석시간과 스토리지(storage) 사용을 줄일 수 있다는 것이다. 반면에 3개 이상의 하위도메인들이 한 점에서 연결되는 경우를 의미하는 cross point에서는 해석의 정확도가 저하되는 경향이 나타났다. 따라서 본 논문에서는 새로운 비중첩 영역 분할기법에 대해 다양한 영역분할의 경우에 따라 발생하는 하나의 cross point에 접촉하는 하위도메인의 개수에 따른 정확도 분석이 수행되고 정확도가 저하되는 원인분석 및 대책이 논의된다.

핵심용어 : 정확도 분석, 비중첩 영역분할, 병렬해석, 계면요소